

образуют сигма ковалентные связи в основном с 2р орбиталями кислорода, в силу чего энергетическая позиция особенности С существенно зависит от длины связи U-O [8]. Известно, что чем короче расстояния между атомами U и O, тем более ковалентная связь образуется между этими атомами. Интенсивность особенности С должна увеличиваться с ростом степени ковалентности связи U-O_{ак}. Расчеты, произведенные с помощью компьютерного кода FEFF9.6, реализующего метод многократного рассеяния, позволили подтвердить данное предположение. Таким образом спектры рентгеновского поглощения HR-XANES M4-края U можно использовать для оценки степени ковалентности связи U-O_{ак}.

Список публикаций:

1. Denecke 2006 *Coordin Chem Rev*, 250, 730-754.
2. Rothe J, Butorin S, Dardenne K, Denecke M A, Kienzler B, Loble M, Metz V, Seibert A, Steppert M, Vitova T, Walther C, Geckeis H 2012 *Rev Sci Instrum*, 83.
3. T. Vitova, Denecke M A, Göttlicher J, Jorissen K, Kas J, Kvashnina K, Prüßmann T, Rehr J, Rothe J 2013 *Journal of Physics: Conference Series*, 430, 012117.

Прогнозирование параметров детонации и факторов чувствительности высокоэнергетических материалов

Празян Тигран Леонидович

Кемеровский государственный университет

Журавлев Юрий Николаевич, д.ф.-м.н.

Prazyan.tigran@yandex.ru

Расчет и дальнейший анализ физико-химических свойств энергетических материалов является одним из наиболее эффективных средств исследования, используемый перед синтезом данных веществ. Таким образом, настоящая работа посвящена расчету структурных, электронных и детонационных характеристик перспективных взрывчатых веществ, ранее не синтезированных [1,2].

Объектами исследования в настоящей работе являются малоизученные и в настоящее время не синтезированные взрывчатые вещества C₃N₅H₃O₄ (A1) и C₆N₅H₃O₆ (TNDP). Посредством первопринципных расчетов для них проведена оптимизация параметров кристаллической решетки с использованием пакета Quantum ESPRESSO [3]. Полная энергия вычислена методом псевдопотенциала в рамках теории функционала плотности в параметризации PBE для обменно-корреляционной энергии. Для учета межмолекулярного взаимодействия использовалась схема Гримма [4], а также использовались ультрамягкие псевдопотенциалы для всех атомов. Оптимизированные параметры кристаллов в дальнейшем послужили для расчета электронных и детонационных свойств в рамках гибридного функционала B3LYP пакета CRYSTAL14 [5]. Базис [6], используемый в пакете CRYSTAL14: C_6-21G*, H_3-1p1G, N_6-31d1G, O_6-31d1

Дискрипторы, полученные в настоящей работе: M_{ave} – средняя молекулярная масса (г/моль), Q – химическая энергия детонации (кДж/моль), ρ – плотность (г/см³), N – число газообразных продуктов детонации на грамм взрывчатого вещества (моль/г), кислородный баланс OB_{100%} (%), усредненный заряд всех нитрогрупп Q_{NO2} (e⁻), т.к. в каждом из объектов имеется по несколько групп NO₂, полная энергия E_{total} (кДж/моль), дисперсионная поправка для кристаллов E_{disp} (кДж/моль) и ширина запрещенной зоны E_g (эВ).

По ранее предложенным [5] формулам для расчета скорости детонации D (км/с), детонационного давления P (ГПа) и чувствительности к удару H_{50%} (см) эти величины для энергетических материалов A1 и TNDP составили 7,29 км/с, 29,6 ГПа, 112 см и 7,71 км/с, 28,2 ГПа, 191 см, соответственно.

Также выявлены зависимости чувствительности к удару от таких определяющих факторов как энергетический зазор, усредненный заряд нитрогруппы и химическая энергия детонации.

Список публикаций:

- [1] Празян Т. Л., Исследование физико-химических свойств ряда взрывчатых веществ методами компьютерного моделирования / Т. Л. Празян, Ю. Н. Журавлев // Вестник КемГУ. 2014. № 4 (60). Т. 2. С. 137-144.
- [2] Празян Т. Л., Исследование физико-химических свойств FOX-7 / Т. Л. Празян, Ю. Н. Журавлев // Известия ВУЗов. Физика. 2015. № 7/2. Т. 58. С. 102-107.
- [3] Giannozzi, P. Quantum ESPRESSO: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials / P. Giannozzi, S. Baroni, N. Bonini // J. Phys.: Condens. Matter, 2009, Vol.21. P.395502.
- [4] Grimme, S. Semiempirical GGA-type density functional constructed with a long-range dispersion correction / S. Grimme // J. Comput. Chem., 2006. Vol.27. P.1787-1799.
- [5] Dovesi, R. CRYSTAL14 User's Manual / R. Dovesi, V.R. Saunders, C. Roetti [et al.] // Torino: University of Torino, 2014.
- [6] CRYSTAL Basis Sets Library [Электронный ресурс] URL: http://www.crystal.unito.it/Basis_Sets/Ptable.html (дата обращения 27.02.2017).
- [7] Празян Т. Л., Исследование методами теории функционала плотности электронной структуры высокоэнергетических материалов / Т. Л. Празян // Сборник материалов XV Российской научной студенческой конференции "Физика твердого тела". 2016. С.203-205.